

Лукоянов А. В., аспирант
Анисимов В. И., проф., д-р физ.-мат. наук

ИНТЕРПРЕТАЦИЯ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ОПТИЧЕСКИХ И РЕНТГЕНОВСКИХ СПЕКТРОВ С ПОМОЩЬЮ РЕЗУЛЬТАТОВ РАСЧЕТОВ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ

Для исследования электронных и оптических свойств реальных соединений используются как экспериментальные, так и теоретические методы. Среди теоретических методов только первопринципные методы расчета зонной структуры позволяют рассчитать электронную структуру, магнитные и оптические свойства, обменные взаимодействия в системе, используя в качестве стартовых данных только кристаллическую структуру соединения. Полученные теоретические данные успешно используются для интерпретации экспериментальных спектров.

В данной работе предложена интерпретация результатов L_3 -эмиссионных (XES – резонансных и нерезонансных), а также $2p$ абсорбционных (XAS) измерений спектров $3d$ -металла а-Мп и его ближайших соседей по $3d$ -периоду – ОЦК Fe и Cr, а также оптической проводимости интерметаллидов соединения серии R_2Fe_{17} (R – редкоземельный элемент) на основе результатов расчетов зонной структуры перечисленных металлов и соединений. Для расчета электронной структуры металлов использовалось приближение локальной электронной (спиновой) плотности (LSDA). В соединениях $4f$ элементов использовался метод LSDA+U, учитывающий сильные одноузельные кулоновские корреляции соответствующих электронов.

Сопоставление рассчитанных парциальных $3d$ -плотностей состояний а-Мп, Fe и Cr с L_3 -эмиссионными резонансными и нерезонансными спектрами показывает хорошее качественное (по положению пиков) и количественное (по относительным интенсивностям) согласие эксперимента и теории. Далее была проведена интерпретация всех особенностей экспериментальных спектров, соответствующих пикам плотности состояний, для вкладов t_{2g} и e_g симметрии и разных проекций спина. Результаты данной работы опубликованы в статье “Природа упругой линии в рентгеновском L_3 -эмиссионном спектре металлического марганца” (Л.Д. Финкельштейн, И.А. Некрасов, А.В. Лукоянов, Э.З. Курмаев, В.И. Анисимов, S. Kučas, A. Kynienė, A. Moewes, J.-L. Wang, Z. Zeng, ФТТ 48, 396 (2006)).

Соединения серии R_2Fe_{17} (R – редкоземельный элемент) привлекают особый интерес в связи с возможностью их использования в постоянных магнитах. Используя рассчитанные парциальные плотности состояний для редкоземельного элемента и железа был оценен вклад от различных межзонных переходов в оптическую проводимость на разных энергетических интервалах. Результаты работы опубликованы в статье “Electronic structure, magnetic, and optical properties of the intermetallic compounds R_2Fe_{17} ($R = Pr, Gd$)”, Yu.V. Knyazev, A.V. Lukoyanov, Yu.I. Kuz'min, A.G. Kuchin, and I.A. Nekrasov, Phys. Rev. B 73, 090285 (2006).